武亚林,徐井旭,凌文翠,等.基于 IV 级逸度模型的典型抗生素多介质环境归趋研究 [J]. 中国环境科学, 2025,45(9):5204-5212.
Wu Y L, Xu J X, Ling W C, et al. Study on multimedia environmental fate of typical antibiotics based on level IV fugacity model [J]. China Environmental Science, 2025,45(9):5204-5212.

基于 IV 级逸度模型的典型抗生素多介质环境归趋研究

武亚林,徐井旭,凌文翠,孙长虹,刘桂中* (北京市生态环境保护科学研究院,国家城市环境污染控制工程技术研究中心,北京 100037)

摘要：逸度模型是应用较为广泛的有机污染物多介质环境归趋模型,基于 IV 级逸度模型,本研究模拟研究了再生水补水河流凉水河中典型抗生素(氧氟沙星和罗红霉素)多介质环境归趋行为,验证了模拟可靠性,分析了平衡时迁移通量,确定了主要迁移过程,并进行了模型关键参数灵敏度分析和不确定性分析.结果表明,模型模拟浓度与实测浓度吻合程度较高,表明模型在该研究区域的模拟有效性;研究区域内环境系统达到平衡时,水相中抗生素主要输出过程为平流过程,沉积物相主要过程是与水相的界面交换过程;平衡时氧氟沙星和罗红霉素在水和沉积物中的含量占比分别是 8.73%和 91.27%,27.46%和 72.54%,可见沉积物是两种抗生素的主要储库;亨利定律常数 H 是影响两相迁移的主要因素.该研究为再生水补给型河流抗生素的环境预测与污染治理提供理论依据及决策参考.

关键词：逸度模型；抗生素；凉水河；多介质环境归趋
中图分类号：X522 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)09-5204-09

Study on multimedia environmental fate of typical antibiotics based on level IV fugacity model. WU Ya-lin, XU Jing-xu, LING Wen-cui, SUN Chang-hong, LIU Gui-zhong* (National Engineering Research Center of Urban Environmental Pollution Control, Beijing Municipal Research Institute of Eco-Environmental Protection, Beijing 100037, China). *China Environmental Science*, 2025,45(9)：5204~5212

Abstract：The fugacity model is a widely used multimedia environmental fate model for organic pollutants. Multimedia environmental fate of typical antibiotics including ofloxacin and roxithromycin in Liangshui River using reclaimed water was simulated and researched based on level IV fugacity model, and the reliability of model was verified in this study. For another, transfer flux and the main transport process were analysed and identified. Meanwhile, the model key parameters were conducted by sensitivity analysis and uncertainty analysis. The results showed that the simulated concentrations were in good agreement with the measured concentrations, which indicated the simulation effectiveness of the model in the study area. When the environmental system reached equilibrium in the study area, the water advection outflow was identified as the primary export process for target antibiotics in water, while the interfacial exchange process with water phase was the major process for sediment. Sediment was the main reservoir of two antibiotics in the study area because of the mass fraction of ofloxacin and roxithromycin in water and sediment, respectively, were 8.73% and 91.27%, 27.46% and 72.54% at equilibrium. Henry's Law constant (H) significantly influenced the two-phase migration behavior. This study provides theoretical basis and decision-making support for environmental prediction and pollution control of antibiotics in rivers using reclaimed water.

Key words：fugacity model；antibiotics；Liangshui River；multimedia environmental fate

抗生素是一类新污染物,在环境中具有“伪持久性”,被广泛应用于预防和治疗人、畜疾病[1-2].研究表明,环境中小剂量的抗生素对生态安全和人体健康造成威胁,抗生素滥用产生的抗性基因问题同样不容忽视[3-4].目前关于抗生素的研究大多集中在环境检测及去除、迁移转化、风险评估等各方面,而对于再生水补给河流中抗生素的迁移归趋模拟报道较少[5-8].但再生水是抗生素的重要汇源[9],研究抗生素在再生水补水河流中的迁移转化对抗生素污染防控比较有意义.应用较多的有机污染物在多介质中迁移归趋的模型有逸度模型、多相总暴露模型、毒害物质物理化学模型、暴露分析模型系统等[10].其中,逸度模型基于 Mackay 教授在 1983 年开发的 QWASI 模型,目前有 I~IV 4 个不同的等级,其中 IV 级模型描述的是非稳态、非平衡的流动环境系统,

收稿日期：2025-01-24
基金项目：北京市生态环境局科技专项项目(BJST20250108)-支撑美丽北京建设的生态环境科技发展战略与管理体系建设研究;北京市生态环境保护科学研究院自主投入项目(Z2025-011)-北京地区典型河流水体药物及个人护理品(PPCPs)赋存、环境行为及溯源研究.
* 责任作者, 研究员, liuguizhong@cee.cn

能较真实的对化学品的归趋行为进行预测和解释,该模型基于质量平衡建立方程,因参数少、算法简单、结果直观等优点脱颖而出[11-14].另外,逸度模型使用逸度代替浓度,将逸度作为平衡标准,解决了不同介质中由于浓度单位不统一造成的模型计算困难等问题[15-16].本研究以北京市再生水补水河流凉水河为例,基于逸度模型模拟氧氟沙星和罗红霉素在再生水厂退水口下游水体及沉积物中的迁移归趋,以期为再生水补水型河流抗生素风险评估和污染控制提供参考.

1　研究方法

1.1　研究区概况

凉水河是北京南部的再生水补水河流,流域面积 696km^2,河长 67km.流域内人口众多,抗生素的生产、使用和排放量较大,特别是喹诺酮类和大环内酯类抗生素,由此产生的环境污染问题较严峻[4].本研究选择凉水河中下段作为研究区,该河补水水源主要是小红门再生水厂(W1)和槐房再生水厂(W2).基于研究区域内各种抗生素的检出水平[4],以氧氟沙星和罗红霉素为目标抗生素,通过构建 IV 级多介质逸度模型,展开目标抗生素在非稳态、非平衡、动态环境系统的模拟研究.图 1 中 S1 为模拟起点,S2~S8 为模拟验证点.S1~S8 点数据基于 2022 年 6 月和 2022 年 9 月的实测数据,因此模型模拟的是 2022 年目标抗生素的多介质归趋行为.

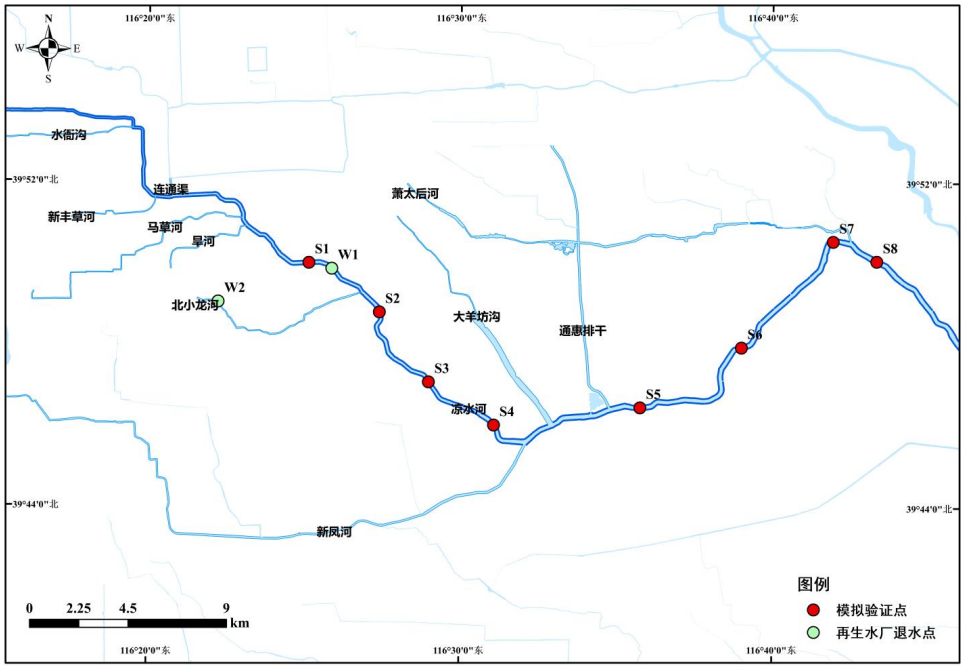
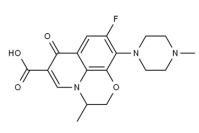
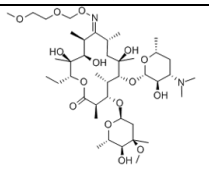


图 1　研究区域示意

Fig.1　Schematic of the study area

表 1　目标抗生素基本信息

Table 1　Basic information of the target antibiotics

物质	氧氟沙星	罗红霉素
分子结构		
种类	喹诺酮类	大环内酯类
分子量(g/mol)	361.4	837
Log*K*ow[(a)]	−0.2	2.75
pKa[(b)]	pKa1=5.97,pKa2=8.28	pKa=9.27

注:(a)通过EPI Suite获取;(b)通过Pubchem获取.

1.2　模型概况

本研究基于逸度概念,将凉水河视作一个系统,考虑水和沉积物两个主环境相,其中水相涉及水子相、悬浮颗粒物子相和水生生物子相,沉积物相包含孔隙水子相和固体沉积物子相,环境过程涉及水相平流输入和输出、水和沉积物相扩散、水相悬浮颗粒物沉降和沉积物再悬浮、两相降解及沉积物埋藏过程,模型基本框架如图 2.根据质量守恒原理,建立每个主环境相的质量平衡方程,如下[17]:

水相:

$$V_1Z_1\frac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}t}=E_i+D_{21}f_2-(D_{12}+D_{1A}+D_{1R})f_1 \quad (1)$$

沉积物相:

$$V_2Z_2\frac{\mathrm{d}f_2}{\mathrm{d}t}=D_{12}f_1-(D_{21}+D_{2R}+D_B)f_2 \quad (2)$$

式中:V_1、V_2 为水相和沉积相的体积,m^3;Z_1、Z_2 为水相和沉积相的逸度容量,mol/(m^3·Pa);f_1、f_2 为水相和沉积相的逸度,Pa;E_i 为第 i 个环境相目标物质的输入速率,mol/h;D_{ij} 为目标物质从环境相 i 到环境相 j 的迁移速率,mol/(Pa·h);D_{iA} 为第 i 个环境相目标物质的平流输出速率,mol/(Pa·h);D_{iR} 为第 i 个环境相目标物质的降解速率,mol/(Pa·h);D_B 为沉积物中目标物质的埋藏速率,mol/(Pa·h).

质量平衡方程通过四阶 Runge–Kutta 法,基于 Matlab,以小时为步长求解.

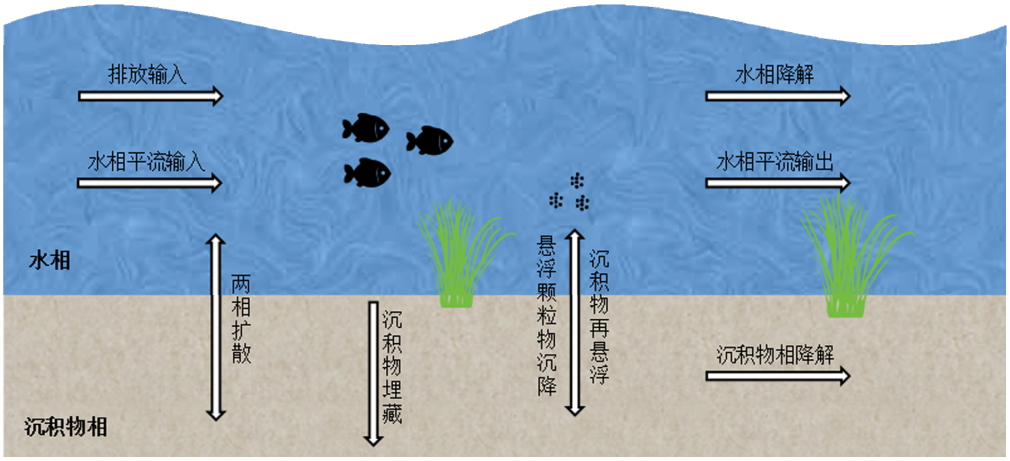


图 2 多介质逸度模型概念

Fig.2 Conceptual diagram of multimedia fugacity model

1.3 模型参数

模型参数涉及模拟抗生素的理化性质参数及研究区的环境参数,对模拟结果至关重要,但由于实际工作中的各项限制,精确地获得所有参数难度较大[18].本研究中各参数部分来自公开报道,部分通过 EPI Suite 计算,部分来自实际测量,具体参数见表 2 和表 3.模型中水相目标抗生素的输入来自上游平流及污水处理厂退水,见表 4.

表 2 模拟抗生素的理化性质参数

Table 2 Parameters of physicochemical properties of simulated antibiotics

抗生素	降解速率常数(h^{-1})		半衰期(h)		亨利定律常数	有机碳吸附系数
	水相($k1$)	沉积物相($k2$)	水相($t1$)	沉积物相($t2$)	H(Pa·m^3/mol)	Koc(L/kg)
氧氟沙星	5.78×10^{-3}	5.33×10^{-5}	1.20×10^{2}[19]	1.30×10^{4}[19]	1.18×10^{-16}[19]	0.99[a]
罗红霉素	1.60×10^{-1}	1.78×10^{-5}	4.32×10^{3}[19]	3.89×10^{4}[19]	5.03×10^{-26}[19]	7.214[a]

[a]注:参数值通过EPI Suite计算获取.

表 3 研究区主要环境参数

Table 3 Main environmental parameters of study area

参数类型	参数描述	参数代码	参数值	来源
水和沉积物特征参数	水在水相中的体积分数	θ_{11}	1	[20]
	悬浮颗粒物在水相中的体积分数	θ_{12}	5×10^{-6}	[20]
	生物相在水相中的体积分数	θ_{13}	1×10^{-6}	[20]
	孔隙水在沉积物相中的体积分数	θ_{21}	0.69	实测
	固相部分在沉积物相中的体积分数	θ_{22}	0.31	实测
	悬浮颗粒物在水中的密度(kg/L)	ρ_{ss}	1.5	[21]

续表 3

参数类型	参数描述	参数代码	参数值	来源
	悬浮颗粒物的有机碳分数	f_{ss}	0.2	[20]
	生物相在水中的密度(kg/L)	ρ_B	1	[21]
	生物相的有机碳分数	f_B	1	[22]
	固相部分在沉积物相中的密度(kg/L)	ρ_s	1.9	实测
	沉积物相中固相部分的有机碳分数	f_s	0.04	[20]
迁移参数	沉积物的埋藏速率(m/h)	U_B	3.40×10^{-8}	[20−21]
	悬浮颗粒物的沉降速率(m/h)	U_D	4.60×10^{-8}	[23]
	沉积物再悬浮速率(m/h)	U_{RE}	1.10×10^{-8}	[23]
	沉积物−水相的分子扩散系数(m^2/h)	B_{MW}	4.00×10^{-6}	[23]
	水相−沉积物的传质系数(m/h)	K_{12}	0.01	[23]
	沉积物平均扩散长度(m)	Y_2	0.025	[21]
环境参数	水相的表面积(m^2)	A_1	2.21×10^6	实测
	沉积物相的表面积(m^2)	A_2	2.21×10^6	实测
	水相的体积(m^3)	V_1	2.27×10^6	实测
	沉积物相的体积(m^3)	V_2	5.52×10^5	实测
	水相的平流流出速率(m^3/h)	G	7.82×10^4	实测

表 4　模拟抗生素的初始输入量(mol/h)

Table 4　Initial input quantity of simulated antibiotics(mol/h)

物质	上游平流	污水处理厂排放输入	合计
氧氟沙星	1.15×10^{-2}	1.15×10^{-3}	1.27×10^{-2}
罗红霉素	1.69×10^{-3}	1.57×10^{-4}	1.85×10^{-3}

1.4　灵敏度分析和不确定性分析

本逸度模型由方程和参数组成,参数本身存在不确定性,为明确输入参数对输出结果的影响程度,以识别模型关键影响参数,开展模型参数敏感性分析.相关研究表明,参数变动范围为+10%或−10%时,获得的敏感性系数差异不大[24],因此,本文选择 25 个参数(表 5)的变动范围为+10%,并计算敏感性系数,如下式:

$$SC_i=\frac{\Delta Y_i/Y_i}{\Delta X_i/X_i} \tag{3}$$

式中:SC_i 为参数 i 的敏感性系数;Y_i 为输入参数 i 时的输出结果;ΔY_i 为输入参数 i 在变动范围内变动时的输出结果变化量;X_i 为输入参数;ΔX_i 为输入参数在变动范围内的变化量,敏感性系数的正负代表输入参数变化对输出结果的正负影响.

蒙特卡洛(Monte Carlo)模拟是目前应用较多的模型不确定分析方法,旨在确定关键影响参数的共同变化对输出结果的影响[10].本文的具体分析过程:以敏感性参数的分布类型代替确定值,通过计算机多次随机选择和重复计算 10000 次,使用模拟结果的第一和第三四分位数的差值(SQR),来量化模型的不确定性信息,该过程使用 Matlab 实现.

表 5　敏感性分析参数及其代码

Table 5　Sensitivity analysis parameters and their codes

参数代码	参数名称	参数代码	参数名称	参数代码	参数名称	参数代码	参数名称	参数代码	参数名称
H	亨利定律常数	θ_{13}	生物相在水相中的体积分数	ρ_B	生物相在水中的密度	U_D	悬浮颗粒物的沉降速率	G	水相平流流出速率
Koc	有机碳吸附系数	θ_{21}	孔隙水在沉积物相中的体积分数	f_B	生物相的有机碳分数	U_{RE}	沉积物再悬浮速率	W	水体宽度
K_1	水相降解速率常数	θ_{22}	固相部分在沉积物相中的体积分数	ρ_s	固相部分在沉积物相中的密度	B_{MW}	沉积物−水相的分子扩散系数	h_1	水深
K_2	沉积物相降解速率常数	ρ_{ss}	悬浮颗粒物在水中的密度	f_s	沉积物相中固相部分的有机碳分数	Y_2	沉积物平均扩散长度	h_2	泥深
θ_{12}	悬浮颗粒物在水相中的体积分数	f_{ss}	悬浮颗粒物的有机碳分数	U_B	沉积物的埋藏速率	K_{12}	水相−沉积物的传质系数	E_i	输入速率

2 结果与讨论

2.1 模拟结果与模型验证

为验证模型的有效性,将模拟抗生素氧氟沙星和罗红霉素在水相和沉积物相中各点位的预测和实测浓度值转化为对数浓度进行对比,具体实测浓度基于以往研究[4].相关研究表明,预测值和实测值浓度相差在一个对数单位内,模拟有效[25-28].由图 3 可见,总体上,模拟浓度与实测浓度吻合程度较高,IV 级逸度模型适用于该研究区域,但由于模拟抗生素含量较低,误差仍较大,两种抗生素模拟值与实测值的对数残差分别为:氧氟沙星水相均值为 0.88,沉积物相均值为 0.51;罗红霉素水相均值为 0.49,沉积物相均值为 0.60.氧氟沙星在水相的模拟误差可接受,但相较不佳,分析原因,模型模拟结果受很多因素影响,如目标物质的理化性质、各环境相特征及排放速率等,且模型参数部分取自文献值,未经校准,与实际环境存在一定误差[29-30].另一方面,实测值取自枯丰水期两次测量平均值,精准反应河道实际浓度有一定局限性.此外,两种物质在两相中模拟浓度均高于实测浓度,分析可能与过高估计排放量有关,两种抗生素输入为上游来水、小红门再生水厂和槐房再生水厂的加权平均计算所得,再生水厂排水量由过往环统数据获得,可能存在过高估计的情况[31].

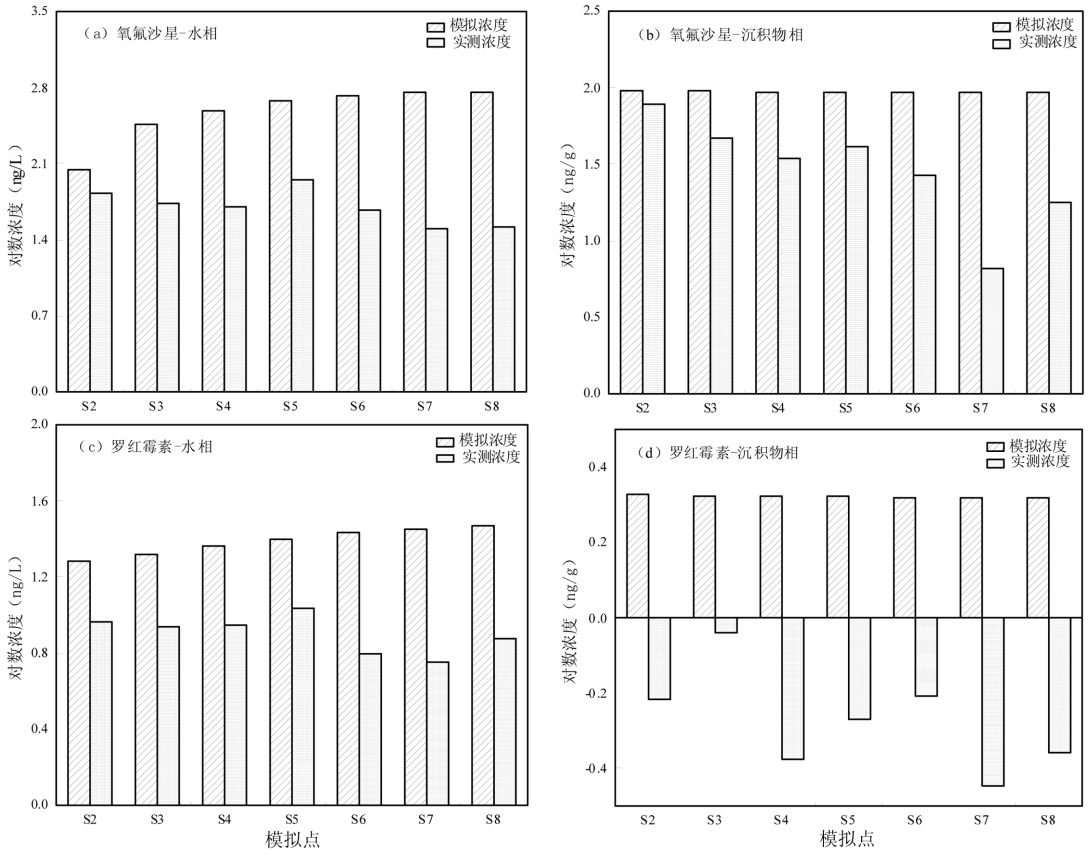


图 3 氧氟沙星和罗红霉素模拟与实测对数浓度对比

Fig.3 Comparison of simulated and measured logsrithmic concentrations of ofloxacin and roxithromycin

2.2 介质迁移与归趋行为

模拟抗生素在水相和沉积物相中的浓度变化如图 4,图中表明,氧氟沙星在水体中的浓度先升后降并趋于稳定,而在沉积物中逐渐降低并趋于稳定,罗红霉素浓度变化规律与之相同,两种抗生素在水体中的平衡时间超过沉积物中的平衡时间.计算平衡时各环境介质的模拟浓度和迁移速率分别如表 6 和图 5.由表 6 可以看出,环境系统平衡时,氧氟沙星、罗红霉素在水相和沉积物相质量百分比分别为 8.73%、91.27%和 27.46%、72.54%,说明沉积物是两种物质的主要储库,目标物质更倾向于在沉积物中富集[32].从图 5 可以看出,对于氧氟沙星,在水相中,平流输出是最主要的输出过程,占水相总输出的 85%,比水相降解以及水相向沉积物迁移高约 1~2 个数量级,与其他研究结果

类似[33];在沉积物中,沉积物向水相迁移是主要的消失途径,占沉积物相总输出的 94%,其次是沉积物降解,沉积物埋藏作用最弱,说明水相是沉积物相抗生素的重要汇区;对于罗红霉素,同样平流输出是水相主要输出过程,占水相总输出的 99%,比水相降解以及水相向沉积物迁移高约 2 个数量级,沉积物中的规律与氧氟沙星相似,沉积物相向水相迁移占沉积物相总输出的 98%.以上结果表明,水相平流作用与沉积物向水相迁移分别是两种抗生素在河流水体和沉积物中的最主要去除方式,吸附于沉积物中的大部分抗生素通过沉积物再悬浮或扩散过程进入到河流水体,而水体中的大部分抗生素将通过水相平流作用注入下游河流.但由于上游来水和污水处理厂出水中的抗生素持续输入到河流中,从而导致河流中的抗生素仍处于较高浓度水平[34-35].本研究探讨了目标抗生素在水相和沉积物相两相中的迁移行为,对于目标抗生素在水相~沉积物相~生物多相的迁移还有进一步研究的空间.

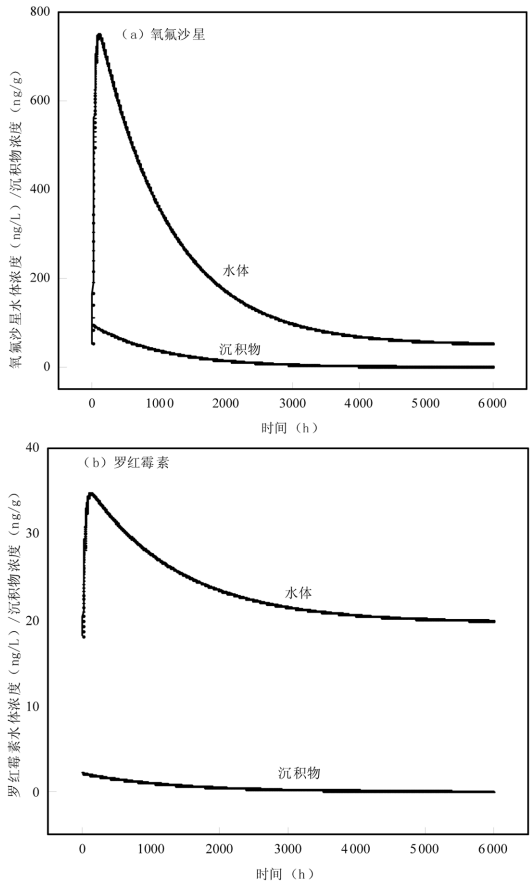


图 4　氧氟沙星和罗红霉素环境介质浓度随时间变化

Fig.4　Concentration variations with time in water and sediment of ofloxacin and roxithromycin

表 6　平衡时两种抗生素在环境介质中的模拟浓度(mol/m^3)

Table 6　Simulated concentrations of two antibiotics in water and sediment at equilibrium

抗生素	水相	沉积物相
氧氟沙星	1.47×10^{-7}	1.54×10^{-6}
罗红霉素	2.38×10^{-8}	6.28×10^{-8}

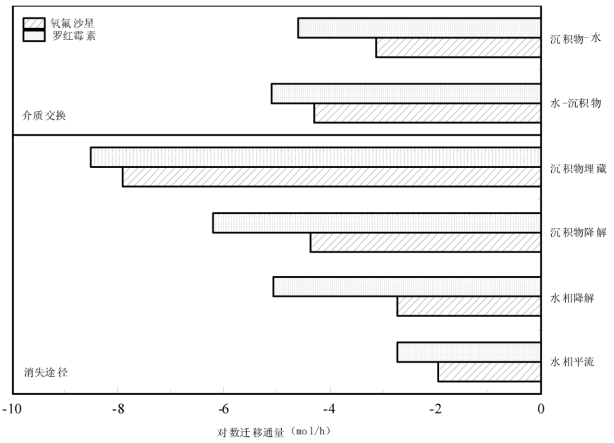


图 5　氧氟沙星和罗红霉素在环境中的迁移通量

Fig.5　The transfer fluxes of ofloxacin and roxithromycin in water and sediment

2.3　模型的灵敏性和不确定分析

对模型的 25 个输入参数进行灵敏度分析,分析结果如图 6 所示,敏感性系数大于 0 表明参数正向影响模型输出结果,小于 0 则反之.

选取敏感性系数绝对值>0.1 的参数进行排序,可得亨利定律常数(H)对两种抗生素在水相、沉积物相中的逸度影响最大,敏感性系数为 1.分析原因,亨利定律常数与温度、化合物性质等多种因素相关,从而成为影响目标物环境行为的重要理化参数.因此,在模型参数获取过程中,应尽可能收集准确的亨利定律常数或实验测定,从而缩小模拟结果与实际结果的差异,保证模型可靠性[18,36].

两种抗生素对其他各项参数敏感性排序各不相同.沉积物-水相的分子扩散系数(B_{MW})、沉积物平均扩散长度(Y_2)、孔隙水在沉积物相中的体积分数(θ_{21})对水相氧氟沙星浓度影响较大,这是由于水相是沉积物相中氧氟沙星的主要汇,因此沉积物相中的环境参数对水相氧氟沙星浓度影响也较大[31].孔隙水在沉积物相中的体积分数(θ_{21})和固相部分在沉积物相中的体积分数(θ_{22})对沉积物相氧氟沙星浓度也有较大影响.对于水相罗红霉素浓度,流出速率(G)、

输入速率(E_i)是影响较大的参数,一定程度说明减少源排放可较有效控制再生水补水河流抗生素浓度.孔隙水在沉积物相中的体积分数(θ_{21})对沉积物中罗红霉素浓度的影响仅次于亨利定律常数(H).综上,孔隙水在沉积物相中的体积分数(θ_{21})也是影响目标抗生素在两相迁移的重要参数,本研究中为了模拟的准确性,通过实测确定该参数值.

除上述进行敏感性分析的参数外,*pH* 值、温度等也是影响抗生素迁移的重要参数.如 *pH* 值的改变会使抗生素的解离状态发生变化,而解离状态的变化,影响其表面电荷,也影响其在不同相的溶解、分配及吸附[37-38].就氧氟沙星 pKa1=5.97,pKa2=8.28,一般当水体 pH<5.97 时,氧氟沙星带正电荷;水体 5.97<pH<8.28 时,其呈现两性离子态;水体 pH>8.28 时,其羧基去质子化,带负电荷.而罗红霉素 pKa=9.27,当水体 pH<9.27 时,罗红霉素带正电荷;水体 pH>9.27 时,罗红霉素呈现中性分子态.另一方面 pH 值也会影响生物活性,从而影响其生物降解效率,对光解和水解也有一定的影响,从而影响其迁移转化.温度亦如此,影响抗生素的溶解度、扩散系数、降解活性等,从而影响抗生素的环境行为[19].另外,水相、沉积物相中有机质的含量也影响其迁移且影响机制比较复杂[39-40].不仅如此,目前一些研究探讨多种新污染物的共迁移行为,如微塑料对抗生素迁移的影响等[37,41].综合考虑参数影响,对模型参数的本地化测定是作者下一步的研究方向.

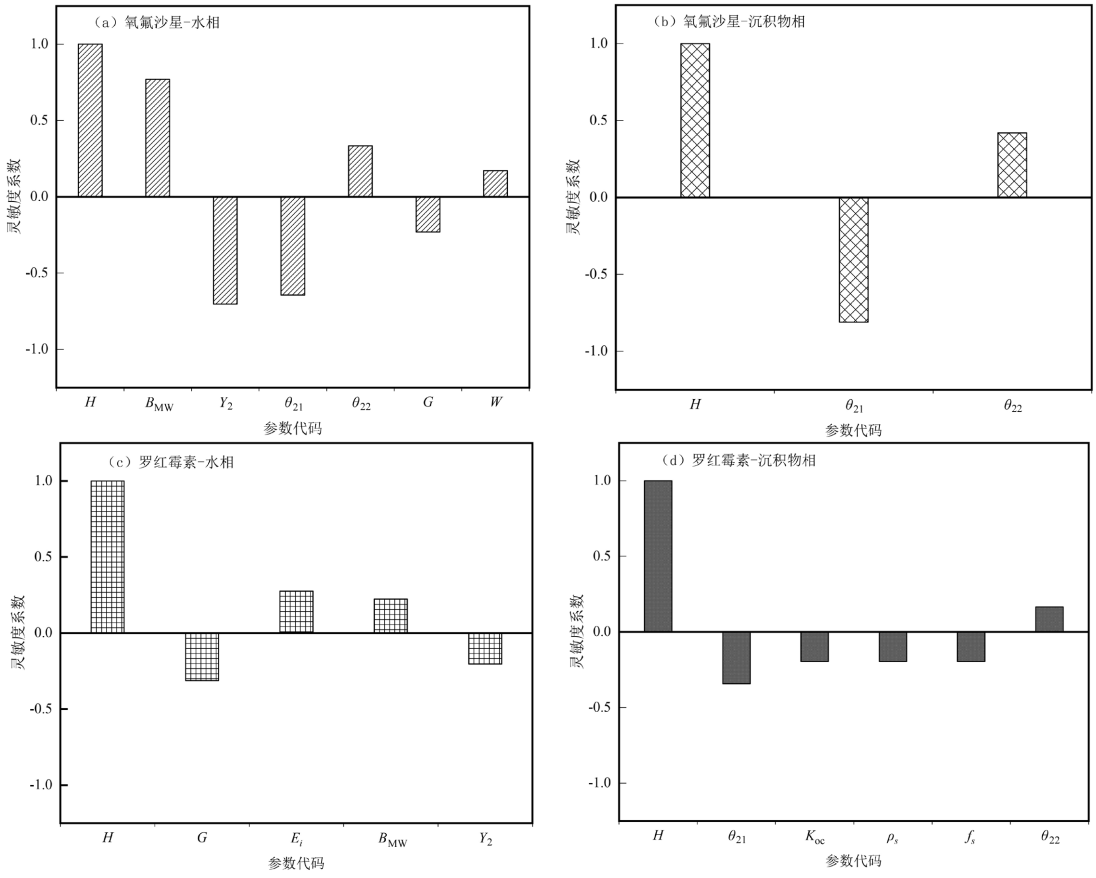


图 6 氧氟沙星和罗红霉素在水相和沉积物相中的灵敏度分析

Fig.6 Sensitivity analysis of key parameters for ofloxacin and roxithromycin in water and sediment

此外,对氧氟沙星和罗红霉素在水相和沉积物相进行不确定性分析,结果表明,SQR 均在一个数量级以下,与以往研究相似[19,42].另外,水相的 SQR (<0.45)比沉积物相的 SQR(<0.04)大,推测与不同参数的灵敏度及参数间影响的相对平衡有关[32].

3 结论

3.1 基于 Level IV 逸度模型模拟了氧氟沙星和罗红霉素两种抗生素在水相、沉积物相中的浓度,模拟值与实测值对数浓度差范围为 0.49~0.88,表明模型

适用于该研究区域.

3.2　氧氟沙星和罗红霉素在水相和沉积物相趋于平衡时,水相的平衡时间大于沉积物相的平衡时间,平衡时水相平流是研究区两种抗生素的主要消失途径,分别占水相总输出的85%和99%,水相−沉积物两相迁移是沉积物主要归趋过程,沉积物是两种物质的主要储库,平衡时两种目标物沉积物相质量百分比分别为 91.27%和 72.54%.

3.3　通过灵敏度分析,亨利定律常数(H)是影响两种抗生素迁移的最主要因素.不确定性分析显示,水相的不确定性较沉积物相大.

参考文献：

[1] Mandaric L, Diamantini E, Stella E, et al. Contamination sources and distribution patterns of pharmaceuticals and personal care products in Alpine rivers strongly affected by tourism [J]. Science of the Total Environment, 2017,590:484−494.

[2] Hu J, Zhou J, Zhou S Q, et al. Occurrence and fate of antibiotics in a wastewater treatment plant and their biological effects on receiving waters in Guizhou [J]. Process Safety & Environmental Protection, 2018,113:483−490.

[3] Sanderson H, Brain R A, Johnson D J, et al. Toxicity classification and evaluation of four pharmaceuticals classes: antibiotics, antineoplastics, cardiovascular, and sex hormones [J]. Toxicology, 2004,203(1−3): 27−40.

[4] 武亚林,徐井旭,刘桂中,等.北京市再生水补水河流中抗生素的赋存特征及生态风险评估 [J]. 环境科学, 2024,45(9):5244−5253.
Wu Y L, Xu J X, Liu G Z, et al. Occurrence characteristics and ecological risk assessment of antibiotics in reclaimed water receiving rivers in Beijing [J]. Environmental Science, 2024,45(9):5244−5253.

[5] Shao S, Hu Y, Cheng J, et al. Research progress on distribution, migration, transformation of antibiotics and antibiotic resistance genes (ARGs) in aquatic environment [J]. Critical Reviews in Biotechnology, 2018,38(8):1−14.

[6] Jiang Y, Ran J, Mao K, et al. Recent progress in Fenton/Fenton−like reactions for the removal of antibiotics in aqueous environments [J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2022,236:113464.

[7] Liu J L, Wong M H. Pharmaceuticals and personal care products (PPCPs): A review on environmental contamination in China [J]. Environment International, 2013,59:208−224.

[8] 武宇圣.淮河流域典型湖泊 PPCPs 污染特征及多介质归趋行为研究 [D]. 苏州:苏州科技大学, 2023.
Wu Y S. Study on PPCPs pollution characteristics and multi−media regression behavior of typical lakes in the Huaihe River Basin [D]. Suzhou: Suzhou University of Science and Technology, 2023.

[9] 孙祖鉴.典型含氟抗生素在季节性结冰水库中的多介质归趋及生物积累研究 [D]. 长春:吉林大学, 2024.
Sun Z J.Multimedia fate and bioaccumulation of typical fluorine−containing antibiotics in the seasonal ice−covered reservoir [D]. Changchun: Jilin University, 2024.

[10] 余情情.基于Ⅳ级逸度模型的典型抗生素环境归趋行为动态模拟与风险评估研究 [D]. 南京:南京大学, 2019.
Yu Q Q. Study on dynamic simulation of typical antibiotics' environmental behavior and risk assessment based on IV fugacity model [D]. Nanjing: Nanjing University, 2019.

[11] 薛南冬,陈宣宇,杨　兵,等.应用环境多介质逸度模型研究废旧电器拆解区多溴联苯醚的迁移及归趋 [J]. 环境科学, 2016,37(11):4326−4332.
Xue N D, Chen X Y, Yang B, et al. Transfer and fate of polybrominated diphenyl ethers in an electrical equipment dismantling area using a multimedia fugacity model [J]. Environmental Science, 2016,37(11):4326−4332.

[12] 曹红英,梁　涛,陶　澍.北京地区有机氯农药的跨界面迁移与归趋 [J]. 应用基础与工程科学学报, 2004,(3):250−259.
Cao H Y, Liang T, Tao S. Simulating the transfer flux and fate of organochlorine pesticide in Beijing [J]. Journal of Basic Science and Engineering, 2004,(3):250−259.

[13] 刘炳光,佟玉洁.应用多介质逸度模型预测五氯酚的环境归宿 [J]. 盐业与化工, 2016,45(8):18−21.
Liu B G, Tong Y J. Application of multi−medium fugacity model in calculation of the environmental fate of pentachlorophenol [J]. Journal of Salt and Chemical Industry, 2016,45(8):18−21.

[14] 唐财俊,赵　祯,钟昊斌,等.长三角全氟辛烷磺酸及前体物的迁移归趋模拟 [J]. 环境科学与技术, 2024,47(5):188−199.
Tang C J, Zhao Z, Zhong H B, et al. Simulation of transport fate of PFOS and precursors in the Yangtze River Delta [J]. Environmental Science & Technology, 2024,47(5):188−199.

[15] Mackay D. Finding fugacity feasible [J]. Environmental Science & Technology, 1979,13(10):1218−1223.

[16] Mackay D. Finding fugacity feasible, fruitful, and fun [J]. Environmental Toxicology & Chemistry, 2004,23(10):2282−2289.

[17] Mackay D. Multimedia Environmental Models: The Fugacity Approach, Seconded [M]. Boca Raton: Lewis Publishers, 2001:122−125.

[18] 王振坤,陈涵冠,姚传刚,等.港口多介质环境中铅和镉的迁移行为及模型研究 [J]. 中国人口·资源与环境, 2014,24(S1):97−101.
Wang Z K, Chen H G, Yao C G, et al. Transport process of Lead and Cadmium in multimedia environment of Tianjin port and its model [J]. China Population, Resources and Environment, 2014,24(S1):97−101.

[19] 张芊芊.中国流域典型新型有机污染物排放量估算、多介质归趋模拟及生态风险评估 [D]. 广州:中国科学院研究生院(广州地球化学研究所), 2015.
Zhang Q Q. Emission estimation, multimedia fate modeling and risk assessment of typical emerging pollutants at river basin scale in China [D]. Guangzhou: Graduate School of Chinese Academy of Sciences (Guangzhou Institute of Geochemistry), 2015.

[20] Mackay D, Paterson S. Evaluating the multimedia fate of organic chemicals: A level III fugacity model [J]. Environmental Science & Technology, 1991,25(3):427−436.

[21] Nazir M, Khan F, Arnyotte P, et al. Multimedia fate of oil spills in a marine environment−An integrated modelling approach [J]. Process Safety And Environmental Protection, 2008,86(B2):141−148.

[22] 孙 畅.典型抗生素在季冻河流封冻期的多介质归趋模拟及生态风险评估 [D]. 长春:吉林大学, 2019.
Sun C. Multimedia fate modeling and ecological risk assessment of typical antibiotics in seasonal frozen rivers during ice-covered period [D]. Changchun: Jilin University, 2019.

[23] Yang M, Khan F, Garaniya V, et al. Multimedia fate modeling of oil spills in ice-infested waters: An exploration of the feasibility of fugacity-based approach [J]. Process Safety and Environmental Protection, 2015,93:206-217.

[24] Zhang Y Z, Song X F, Kondoh A, et al. Behavior, mass inventories and modeling evaluation of xenobiotic endocrine-disrupting chemicals along an urban receiving wastewater river in Henan Province, China [J]. Water Research, 2011,45(1):292-302.

[25] Feng Y, Sun Q, Gao P, et al. Polycyclic aromatic hydrocarbons in surface water from the Songhua river of China [J]. Fresenius Environmental Bulletin, 2009,18(12):2388-2395.

[26] 韩 珍,裴国霞,张 琦,等.黄河头道拐冰封期α-HCH逸度模型的建立与验证 [J]. 干旱区资源与环境, 2014,28(12):184-189.
Han Z, Pei G X, Zhang Q, et al. Fate simulation and model verification of α-HCH during the icebound season at the Toudaoguai of the Yellow River in Inner Mongolia by fugacity model [J]. Journal of Arid Land Resources and Environment, 2014,28(12):184-189.

[27] 汪祖丞,刘 敏,杨 毅,等.菲在长江口的多介质归趋模拟 [J]. 环境科学, 2011,32(8):2444-2449.
Wang Z C, Liu M, Yang Y, et al. Simulation of multimedia fate of Phenanthrene in the Yangtze Estuary [J]. Environmental Science, 2011,32(8):2444-2449.

[28] 汪祖丞,刘 敏,杨 毅,等.上海城区多环芳烃的多介质归趋模拟研究 [J]. 中国环境科学, 2011,31(6):984-990.
Wang Z C, Liu M, Yang Y, et al. Simulation of multimedia fate of PAHs in Shanghai City [J]. China Environmental Science, 2011,31(6): 984-990.

[29] Zhang Q Q, Zhao J L, Liu Y S, et al. Multimedia modeling of the fate of triclosan and triclocarban in the Dongjiang River Basin, South China and comparison with field data [J]. Environ Sci Process Impacts, 2013,15(11):2142-2152.

[30] Wang Y, Fan L, Khan S J, et al. Fugacity modelling of the fate of micropollutants in aqueous systems — Uncertainty and sensitivity issues [J]. Science of The Total Environment, 2019,699:134249.

[31] 陈昱如.长江流域典型抗生素的归趋模拟及风险削减研究 [D]. 上海:上海师范大学, 2024.
Chen Y R. Fate simulation and risk mitigation of typical antibiotics in the Yangtze River Basin [D]. Shanghai: Shanghai Normal University, 2024.

[32] 田 慧,郭 强,毛潇萱,等.广州地区典型多溴联苯醚迁移和归趋行为模拟 [J]. 中国环境科学, 2014,34(3):758-765.
Tian H, Guo Q, Mao X X, et al. Simulating the transfer and fate of typical PBDEs in Guangzhou [J]. China Environmental Science, 2014, 34(3):758-765.

[33] Zhang Z B, Duan Y P, Zhang Z J, et al. Multimedia fate model and risk assessment of typical antibiotics in the integrated demonstration zone of the Yangtze River Delta, China [J]. Science of The Total Environment, 2022,805:150258.

[34] Dinh Q T, Moreau-Guigon E, Labadie P, et al. Occurrence of antibiotics in rural catchments [J]. Chemosphere, 2017,168:483-490.

[35] Paíga P, Santos L H M L M, Ramos S, et al. Presence of pharmaceuticals in the Lis river (Portugal): Sources, fate and seasonal variation [J]. Science of The Total Environment, 2016,573:164-177.

[36] 刘 丹,张圣虎,刘济宁,等.南京地区 PCB52 多介质迁移归趋行为模拟及环境风险评价 [J]. 生态毒理学报, 2015,10(2):353-361.
Liu D, Zhang S H, Liu J N, et al. Simulating the transfer and fate and environmental risk assessment of PCB52 in Nanjing [J]. Asian Journal of Ecotoxicology, 2015,10(2):353-361.

[37] 李凯贺,门 聪,程世昆,等.土壤中微塑料与抗生素吸附、迁移及复合毒性研究进展 [J/OL]. 环境科学, 2025.DOI:10.13227/j.hjkx.202405030.
Li K H, Men C, Cheng S K, et al. Research progress on adsorption, migration, and compound toxic of microplastics and antibiotics in soil [J/OL]. Environmental Science, 2025.DOI:10.13227/j.hjkx.202405030.

[38] 孙凯璇,向 令,孙占学,等.典型抗生素在多孔介质中迁移特性的对比研究 [J]. 环境科学学报, 2020,40(5):1786-1797.
Sun K X, Xiang L, Sun Z X, et al. Comparing the transport behavior of typical sulfonamides and fluoroquinolones in granular porous media [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2020,40(5):1786-1797.

[39] 闫靖丰.基于 DGT 研究抗生素在水-沉积物界面的迁移与分配行为 [D]. 西安:陕西科技大学, 2024.
Yan J F. A study on the antibiotic transport and partition behavior between the water-sediment interface using DGT [D]. Xi'an: Shaanxi University of Science & Technology, 2024.

[40] 肖慧芸,胡锦昇,唐翔宇,等.猪粪溶解性有机质的亲水和疏水组分对土壤中抗生素迁移的影响 [J]. 中国环境科学, 2025,45(7):3855-3866.
Xiao H Y, Hu J S, Tang X Y, et al. Effects of hydrophilic and hydrophobic fractions of pig manure dissolved organic matter on the adsorption and transport of antibiotics in soils [J]. 2025,45(7):3855-3866.

[41] 梁金妮.珠江河口沉积物微塑料污染及其对环丙沙星的吸附与迁移的影响研究 [D]. 广州:华南理工大学, 2023.
Liang J N. Microplastic pollution in the Pearl River estuary sediments and its impact on ciprofloxacin adsorption and migration [D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2023.

[42] Chen H, Jing L, Teng Y, et al. Multimedia fate modeling and risk assessment of antibiotics in a water-scarce megacity [J]. Journal of Hazardous Materials, 2018,348:75-83.

作者简介：武亚林(1994-),女,河南虞城人,中国石油大学(北京)硕士研究生,主要从事地表水环境中新污染物赋存及迁移转化研究.发表论文 20 余篇.wuyalin@cee.cn.